

# **СЕКЦИЯ 1. СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В МЕТАЛЛОВЕДЕНИИ**

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕОРИЕНТАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ**

*Беляевских А.С., Лобанова Е.М.*

ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», г. Екатеринбург  
**tofm@urfu.ru**

С использованием методов математического моделирования на основе модели Шмида выполнены расчеты переориентаций кристаллической решетки металлических монокристаллов при холодной прокатке. Показано, что при больших степенях деформации кристаллическая решетка монокристалла приобретает ориентировку, соответствующую одному из основных типов текстур для металлов.

Текстура определяет эксплуатационные ориентационно-зависимые свойства кристаллических материалов, являясь во многих случаях основным фактором, способствующим достижению в них наилучшего уровня физических и механических характеристик. На протяжении нескольких десятилетий усилия исследователей были направлены на создание и совершенствование необходимого типа текстуры в материалах, находящих широкое использование в промышленности (стали для глубокой вытяжки, холоднокатаные электротехнические стали, магнитотвердые материалы). Задачи получения и оптимизации кристаллографической текстуры приобретают еще большее значение в настоящее время, что связано с развитием нанотехнологий.

Решение задач по получению определенного типа текстуры связано с уровнем понимания закономерностей и механизмов переориентации кристаллической решетки в материале при деформации. Холодная прокатка является одним из основных технологических приемов получения промышленно важных листовых материалов. Важно отметить, что при холодной прокатке в материале практически всегда возникает тот или иной тип ограниченных текстур.

Целью настоящего исследования было с использованием математического моделирования проанализировать возможные переориентации монокристаллов с ОЦК-решеткой в зависимости от их исходной ориентировки при холодной прокатке.

Расчеты переориентации кристаллической решетки монокристалла основывались на численной реализации модели [1]. В данной модели

переориентация решетки при действии нескольких систем скольжения представлена следующем образом:

$$\vec{R}' = \vec{R} + \int \sum_i (\vec{P}_i \cdot \vec{R}) \cdot \vec{D}_i d\gamma_i, \quad \vec{N}' = \vec{N} + \int \sum_i [(\vec{P}_i \cdot \vec{R}) \cdot \vec{T} - (\vec{P}_i \cdot \vec{T}) \cdot \vec{R}] \times \vec{D}_i d\gamma_i, \quad (1)$$

где  $\vec{R}$ ,  $\vec{N}$ ,  $\vec{T}$  – начальные единичные векторы вдоль направления прокатки (НП), нормали к плоскости прокатки (НН) и перпендикулярным им направлением (ПН), соответственно.  $\vec{R}'$ ,  $\vec{N}'$ ,  $\vec{T}'$  – векторы, параллельные соответственно НП, НН и ПН после деформации.  $\vec{P}_i$  – единичный вектор нормали к i-ой плоскости скольжения,  $\vec{D}_i$  – единичный вектор i-ого направления сдвига,  $\gamma_i$  – сдвиговая деформация по i-ой системе скольжения.

При численной реализации модели исходно были заданы ориентировки монокристаллов в виде векторов  $(hkl) \equiv \vec{N}$ ;  $[uvw] \equiv \vec{R}$ , и все возможные системы скольжения в виде  $\vec{P}_i$  и  $\vec{D}_i$  (где i – условный номер системы скольжения). Для ОЦК-решетки задавались системы скольжения  $\{110\}\langle 111 \rangle$ ,  $\{112\}\langle 111 \rangle$ .

Бесконечно малые деформации  $d\gamma_i$  заменялись малыми деформациями  $\Delta\gamma_i$ , значения которых принимались пропорциональными величинам факторов Шмида для каждой i-той системы скольжения.

При моделировании предполагалось, что при холодной прокатке реализуются максимальные растягивающие напряжения вдоль оси прокатки (вдоль направления прокатки) и сжимающие напряжения в направлении, перпендикулярном плоскости прокатки (ПН). Подобная схема предполагает возникновение касательных напряжений, вызываемых деформацией под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки. Согласно данной модели фактор Шмида рассчитывался следующим образом [2]:

$$m = \cos(\lambda_1) \cdot \cos(\Theta_1) - \cos(\lambda_2) \cdot \cos(\Theta_2), \quad (2)$$

где  $\lambda_1$  – угол между нормалью к плоскости скольжения и осью действующих напряжений сжатия,  $\Theta_1$  – угол между направлением скольжения и осью напряжений сжатия,  $\lambda_2$  – угол между нормалью к плоскости скольжения и осью действующих напряжений растяжения,  $\Theta_2$  – угол между направлением скольжения и осью действующих напряжений растяжения.

При расчете  $\Delta\gamma_i$  делилась на число возможных – j (не менее 1000) малых шагов. Результаты расчетов на j-ом шаге, использовались как исходные для j+1 шага. Также после каждого шага рассчитывалась степень деформации по следующему выражению:

$$\varepsilon = \left(1 - \frac{|\vec{R}|}{|\vec{R}'|}\right) \cdot 100\%. \quad (3)$$

Результаты расчетов сравнивались с результатами расчетов по аналитической модели [3]. Показано, что они находятся в хорошем согласии.

Примеры расчетов приведены в таблице 1. Показано, что деформация с большими степенями деформации при холодной прокатке ОЦК монокристаллов приводит к ориентировкам, соответствующим основным типам текстур для ОЦК металлов, а именно:  $(001)[110]$ , двум ориентировкам из семейства  $\{112\}\langle 110 \rangle$ , двум ориентациям из семейства  $\{111\}\langle 110 \rangle$  и двум ориентациям из семейства  $\{111\}\langle 112 \rangle$ . Данные ориентировки являются стабильными в том смысле, что при их деформации существуют системы скольжения, действие которых приводит к взаимно противоположным поворотам решетки, т.е. данные системы уравнивают друг друга с сохранением ориентации решетки образца. Интересным фактом является то, что  $(001)[100]$  и  $(110)[110]$  не появляются, как результат переориентации монокристалла любой исходной ориентировки и могут быть получены только путем их сохранения.

Также важно отметить с точки зрения реализации текстурной наследственности в электротехнической анизотропной стали, что ориентировки  $\{110\}\langle 001 \rangle \pm \lambda$  ( $\lambda$  до  $16^\circ$ ) при холодной деформации переориентируется в ориентировки  $\{111\}\langle 112 \rangle$ , а ориентировка  $\{110\}\langle 001 \rangle \pm \lambda$  ( $\lambda$  от  $16^\circ$  до  $35^\circ$ ) переориентируется в практически идеальную  $\{111\}\langle 110 \rangle$ . Результаты расчетов согласуются с данными [4].

Авторы выражают признательность за содействие программе поддержки ведущих университетов РФ в целях повышения их конкурентоспособности №211 Правительства РФ № 02.А03.21.0006.

Таблица 1 Результаты численных расчетов переориентации ОЦК-решетки в процессе холодной прокатки в виде ориентации элементарных ячеек

	Степень деформации, %			
	10	30	50	> 70
 $\{110\}\langle 001 \rangle$				
 $\{110\}\langle 111 \rangle$				

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ:

1. Taoka T., Furubayashi E. and Takeuchi S. Formation of Cold-Rolled Texture and Recrystallized Texture in Single Crystals of 3% Silicon Iron. Part I. Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan. 1966. V6. №7. P. 201-232.

2. M. Holscher, D. Raabe, K. Lucke. Relationship between rolling textures and shear textures in f.c.c and b.c.c. metals // Acta metall. Mater. 1994. V. 42. №3. P. 879-886.

3. Русаков Г.М., Лобанов М.Л., Редикульцев А.А., Каган И.В. Модель переориентации монокристаллов с ОЦК-решеткой при холодной прокатке // Известия ВУЗов. Черная металлургия. 2010. №3. С. 34-40.

4. Лобанов М.Л., Редикульцев А.А., Русаков Г.М., Каган И.В., Первушина О.В. Влияние ориентировки зерен материала для изготовления сверхтонкой электротехнической анизотропной стали на ее текстуру и магнитные свойства // ФММ. 2011. Т. 111. №5. С. 502-509.